Index

Pagina

Commentationes et Relationes

AMOS, A. T., and H. G. FF. ROBERTS: A Modified Hückel Method for Calculating Ring Current Contributions to the Diamagnetic Susceptibilities of Conjugated Hydrocarbons 421
ARMSTRONG, D. R., see CLARK, D. T. 365
AŽMAN, A., B. BORŠTNIK, and J. KOLLER: A CNDO and INDO Calculation of Nuclear Spin-Spin Coupling Constants in HF, HF_2^- and $H_2F_3^-$ 262

BAILEY, M. L.: Semi-Empirical π-Electron Calculations 56
BALLHAUSEN, C. J., see BECKER, C. A. L., et al. 355
BASILEVSKY, M. V.: Some New Aspects of π-Electron Theory 409
BECKER, C. A. L., C. J. BALLHAUSEN, and I. TRABJERG: Investigation of the Electronic Structure of $TiCl_4$ 355
BENEDER, G. P., see DE JEU, W. H. 349
BERSOHN, M., M. GLICKSOHN, and J. STEWART: A Procedure for Obtaining Lower Bounds for Ground State Energies of Atoms and Molecules 155
BORŠTNIK, B., see AŽMAN, A., et al. 262
BUEMI, G., see FAVINI, G. 79
BURNHAM, D. R.: Spin Contamination in PPP Unrestricted Hartree-Fock Wave Functions 428

CAMERMAN, N., and S. C. NYBURG: E.H.M.O. Calculations on the Actual Conformations of Thymine Photodimers 162
CHALVET, O., and C. LEIBOVICI: Etude théorique de dérivés substitués du benzène. III. Les fluorobenzènes 297
Theoretical Study of Substituted Benzenes. III. The Fluorobenzenes
CHESNUT, D. B., and R. W. MOSELEY: The Geometries of Molecular Complexes: An Extended Hückel Approach 230
CHONG, D. P., see YUE, C. P. 159
CLARK, D. T., and D. R. ARMSTRONG: Non-Empirical LCAO-MO-SCF Calculations with Gaussian Type Functions on the Electrocyclic Transformation of Cyclopropyl to Allyl 365
Part I. Cation Transformation
CLAVERIE, P., see DINER, S., et al. 1
— see MALRIEU, J. P., et al. 18
CSIZMADIA, I. G., see HOPKINSON, A. C., et al. 65

DANILOV, V. I., Y. A. KRUGLYAK, and V. I. PECHENAYA: The Electron Density-Bond Order Matrix and the Spin Density in the Restricted CI Method 288
DAVIS, R. E., see MURTHY, A. S. N., et al. 81
DINER, S., J. P. MALRIEU, and P. CLAVERIE: Localized Bond Orbitals and the Correlation Problem. I. The Perturbation Calculation of Ground State Energy 1
— see MALRIEU, P., et al. 18

EMPEDOCLES, PH.: Range Relaxation. I. Calculation of Ground State Energy Curves. . 139

Pagina

FAVINI, G., and G. BUEMI: Calculation of Electronic Spectra of Pyrido[2,3-*d*]Pyridazine and Pyrido[3,4-*d*]Pyridazine 79

FAVINI, G., A. GAMBA, and M. SIMONETTA: Interpretation of Electronic Spectra of Aromatic Hydrocarbons by the "Molecules in Molecules" Method 175

FISCHER, H., and H. KOLLMAR: A Reparametrization of the CNDO Method. I. Hydrocarbons 213

FRANCHINI, P. F., and C. VERGANI: GF Calculation with Minimal and Extended Basis Sets for H_2O, NH_3, CH_4 and H_2O_2 46

GAMBA, A., see FAVINI, G., et al. 175

GIESSNER-PRETTRE, C., and A. PULLMAN: The Effect of σ and π Singly-Excited Configurations in the Calculation of Excited States by the CNDO and INDO Approximations 265

GLAZE, W. H., see PEYTON, G. R. 259

GLICKSOHN, M., see BERSOHN, M., et al. 155

GOUTERMAN, M., see MCHUGH, A. J. 249

HANSEN, A. E., and K. KAMPP: Valence Bond Study of the $B^1\Sigma_u^+$ State of the Hydrogen Molecule 109

HOPKINSON, A. C., R. A. MCCLELLAND, K. YATES, and I. G. CSIZMADIA: An Attempted Application of the Extended Hückel Molecular Orbital Approach to Reactions Involving Charged Species 65

I'HAYA, Y. J., see SAKAMOTO, K. 220

JANKOWSKI, K.: A Perturbation Treatment for Two-Electron Atomic Systems with Correlation in Zero Order 165

DE JEU, W. H., and G. P. BENEDER: Comparison of Pople-Santry Type and Hoffmann Type Calculations of Nuclear Spin-Spin Coupling 349

KAMPP, K., see HANSEN, A. E. 109

KARLSSON, G., and O. MÅRTENSSON: Charge Influence in Semi-Empirical Calculations of Heteroatomic Ionic and Neutral Molecules 195

KATÔ, H., see YONEZAWA, T., et al. 125

KATO, H., see YONEZAWA, T., et al. 125

KHETRAPAL, C. L., and D. K. RAI: Pariser-Parr-Pople Type SCF-MO-CI Calculations on Pentafluorobenzenes 308

KOLLER, J., see AŽMAN, A., et al. 262

KOLLMAR, H., see FISCHER, H. 213

KRUGLYAK, Y. A., see DANILOV, V. I., et al. 288

KWIATKOWSKI, J. S.: Electronic Structure and Spectra of Organic Molecules. Part IX. SCF MO CI Calculations for 2,6-Disubstituted Purines 149

LAURENZI, B. J.: Isoelectric Molecules 106

LEHN, J. M., B. MUNSCH, PH. MILLIE et A. VEILLARD: Analyse conformationnelle théorique. III. Etude *ab initio* SCF-LCAO-MO de l'inversion de l'azote dans l'Aziridine et dans l'Oxaziridine 313

Theoretical Conformational Analysis. III. Nitrogen Inversion: An ab initio SCF-LCAO-MO study of Aziridine and Oxaziridine

LEIBOVICI, C., see CHALVET, O. 297

Pagina

MALRIEU, J. P., P. CLAVERIE, and S. DINER: Localized Bond Orbitals and the Correlation Problem. II. Application to π-Electron Systems 18
— see DINER, S., et al. 1
MÅRTENSSON, O., see KARLSSON, G. 195
MCCLELLAND, R. A., see HOPKINSON, A. C., et al. 65
MCHUGH, A. J., and M. GOUTERMAN: Oscillator Strengths for Electronic Spectra of Conjugated Molecules from Transition Gradients. III. Polyacenes 249
MELY, B., and A. PULLMAN: *Ab initio* Calculations on Cytosine, Thymine and Adenine 278
MILLIE, PH., see LEHN, J. M., et al. 313
MISURKIN, I. A., and A. A. OVCHINNIKOV: Electronic Structure of High π-Electron Systems (Graphite, Polyacene, Cumulene) 115
MOSELEY, R. W., see CHESNUT, D. B. 230
MUNSCH, B., see LEHN, J. M., et al. 313
MURTHY, A. S. N., R. E. DAVIS, and C. N. R. RAO: Hydrogen Bonding: A Molecular Orbital Treatment by the EHT and the CNDO/2 Methods of Methanol and of Formic Acid 81

NIKITIN, E. E., see UMANSKIJ, S. JA. 91
NYBURG, S. C., see CAMERMAN, N. 162

OVCHINNIKOV, A. A., see MISURKIN, I. A. 115

PASCHALIS, E., and A. WEISS: Hartree-Fock-Roothaan Wave Functions, Electron Density Distribution, Diamagnetic Susceptibility, Dipole Polarizability and Antishielding Factor for Ions in Crystals 381
PECHENAYA, V. I., see DANILOV, V. I., et al. 288
PEYTON, G. R., and W. H. GLAZE: Bonding Properties in Organolithium Aggregates . . 259
PULLMAN, A., see GIESSNER-PRETTRE, C. 265
— see MELY, B. 278

RAI, D. K., see KHETRAPAL, C. L. 308
RAO, C. N. R., see MURTHY, A. S. N., et al. 81
ROBERTS, G., and K. D. WARREN: Justification of the Mataga-Nishimoto Approximation 353
ROBERTS, H. G. FF., see AMOS, A. T. 421
ROBERTS, P. J.: Correlation Factor for Ground State of Helium 340

SAKAMOTO, K., and Y. J. I'HAYA: The Role of the Doubly Excited Configurations in the π-Electronic Structure of the Croconate Anion 220
SIMONETTA, M., see FAVINI, G., et al. 175
STEWART, J., see BERSOHN, M., et al. 155

TINLAND, B.: A CNDO CI Study of the Electronic Structure and Spectrum of Nitrobenzene 171
TRABJERG, I., see BECKER, C. A. L., et al. 355

UMANSKIJ, S. JA., und E. E. NIKITIN: Elektronenwellenfunktionen und Terme zweiatomiger Moleküle bei großen Atomabständen 91
Electronic Wavefunctions and States of Diatomic Molecules at Large Atomic Distances

VEILLARD, A., see LEHN, J. M., et al. 313
VERGANI, C., see FRANCHINI, P. F. 46

Pagina

WARREN, K. D., see ROBERTS, G. 353
WEISS, A., see PASCHALIS, E. 381

YATES, K., see HOPKINSON, A. C., et al. 65
YERANOS, W. A.: Determination of Approximate Bond Dissociation Energies by a Semi-Empirical MO Technique 346
YONEZAWA, T., H. KATÔ, and H. KATO: Semi-Empirical Molecular Orbital Calculations. The Electronic Structure and the Spin-Orbit Coupling in Azabenzenes. 125
YUE, C. P., and D. P. CHONG: Studies of Off-Diagonal Hypervirial Constraints 159

Erratum

RETTIG, M. F., P. S. HAN, and T. P. DAS: Calculation of Hyperfine Field and Quadrupole Splitting in Ferriprotoporphyrin IX Chloride (Hemin) 432

Recensio

Advances in Quantum Chemistry, Vol. 4. Ed. P. O. LÖWDIN (Ref. K. JUG) 264

Theoretica Chimica Acta

For speedy publication, this journal is issued at frequent intervals, according to the amount of material received, 5 issues normally constituting one volume. Price per volume: DM 96.—.

It is a fundamental condition that manuscripts submitted should not have been published elsewhere, in this or any other country. The author must undertake not to publish elsewhere at a later date. With the acceptance of a manuscript for publication, the publishers acquire the sole copyright for all languages and countries, including all rights of photocopying or reproduction by any other method.

The use in this journal of registered or trade names, trademarks etc. without special acknowledgement does not imply that such names, as defined, by the relevant protection laws, may be regarded as unprotected and thus free for general use.

Die Zeitschrift erscheint, um eine rasche Publikation zu ermöglichen, in einzelnen Heften, die zu Bänden vereinigt werden. Ein Band besteht im allgemeinen aus 5 Heften. Der Preis eines Bandes beträgt DM 96.—.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, sie auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,30 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinn der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Afin d'assurer la publication la plus rapide possible, la revue paraît aux courts intervalles, dans la mesure des articles reçus. En générale un volume se compose de 5 fascicules. Le prix de chaque volume est de 96 DM.

L'attention est tout particulièrement attirée sur le fait qu'une fois le manuscrit accepté et publié par les éditeurs, l'unique copyright pour tous pays et toutes langues leur est réservé. Ne doivent être en principe envoyés que les ouvrages qui n'ont jamais été et ne seront jamais publiés ni dans le pays même de l'auteur ni à l'étranger.

En outre, il n'est pas permis sans l'autorisation expresse des éditeurs de faire des reproductions photographiques, des microfilms, des microphotos, etc. . . . , des revues publiées, des communications individuelles ou d'extraits de ces dernières.

La reproduction dans cette revue de marques déposées, marques de fabrique, désignations de marchandises, etc., même sans indication spéciale, n'autorise pas à croire que ces noms définis pas la législation commerciale sur les marques et la propriété industrielle puissent être laissés au libre usage de chacun.

Pagina

Commentationes

BECKER, C. A. L., C. J. BALLHAUSEN, and I. TRABJERG: Investigation of the Electronic Structure of $TiCl_4$ 355

CLARK, D. T., and D. R. ARMSTRONG: Non-Empirical LCAO-MO-SCF Calculations with Gaussian Type Functions on the Electrocyclic Transformation of Cyclopropyl to Allyl 365
Part I. Cation Transformation

PASCHALIS, E., and A. WEISS: Hartree-Fock-Roothaan Wave Functions, Electron Density Distribution, Diamagnetic Susceptibility, Dipole Polarizability and Antishielding Factor for Ions in Crystals 381

BASILEVSKY, M. V.: Some New Aspects of π-Electron Theory 409

AMOS, A. T., and H. G. FF. ROBERTS: A Modified Hückel Method for Calculating Ring Current Contributions to the Diamagnetic Susceptibilities of Conjugated Hydrocarbons 421

Relatio

BURNHAM, D. R.: Spin Contamination in PPP Unrestricted Hartree-Fock Wave Functions 428

Erratum

RETTIG, M. F., P. S. HAN, and T. P. DAS: Calculation of Hyperfine Field and Quadrupole Splitting in Ferriprotoporphyrin IX Chloride (Hemin) 432

Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg · New York
Druck: Brühlsche Universitätsdruckerei, Gießen
Printed in Germany
Verantwortlich für den Anzeigenteil: Edgar Seidler, 1 Berlin 33, Heidelberger Platz 3